

제 8 회

우수리포트 공모대회 우수상 수상작

# Imidazolium TFSI에서의 치환체 변화를 통한 ionic liquid의 합성 및 물성 평가

김현수

(공과대학 화학생물공학부)

\* 이 글은 2008년 1학기 '과학과 기술 글쓰기' (담당교수: 정운석) 강좌의 리포트이다.



# 차 례

## I. 서론

1. 연구 배경
2. 연구 목적

## II. 배경 이론 및 선행 연구의 검토

1. 배경 이론
2. 선행 연구의 검토

## III. 연구 방법

1. 연구 대상 물질에 대한 합성 과정
2. 물성 측정 방법
  - (1) 기본 물성의 측정 (녹는점 및 점도)
  - (2) 전기 화학적 물성의 측정 (Cyclic voltammogram)
3. 입체 구조 예측 방법

## IV. 연구 결과

1. 기본 물성의 비교
2. 전기 화학적 특성의 비교
3. 입체 구조의 비교

## V. 논의 및 결론

\* 참고문헌

## 초 록

본 논문은 Imidazolium bis(trifluoromethanesulfonyl)imide ionic liquid의 기본적 물성 및 전기화학적 안정성, 그리고 입체 구조에 대하여 다루고 있다.

연구 대상의 cation(양이온)은 Imidazolium의 3번 질소의 치환체를 methyl로 고정시킨 후 1번 질소의 치환체를 변화시켜감에 따라 합성한 것이며 본 연구는 이 새롭게 생성된 물질의 물성변화를 측정하였다. 측정한 물성은 DSC를 이용한 녹는점과 viscometer를 통해 측정한 점도 및 Cyclic voltammogram을 통한 전기 화학적 안정성의 총 세 가지에 해당한다. 또한 ChemBio 3D Ultra 11.0.1 CambridgeSoft Corp.를 통해 평면 구조 및 입체 구조를 예측하고 앞서 측정한 물성들과의 연관성을 예측하였다. 이를 통해 일반적으로 치환체의 chain 길이가 늘어남에 따라 녹는점 및 점도가 높아졌음을 확인하였다. 우선 치환체가 커지면 cation의 크기도 커지고 이에 따라 anion(음이온)과의 상대적 크기 차이가 줄어들게 된다. 이로써 보다 쉽게 cation과 anion이 격자구조를 형성하여 녹는점이 높아지게 된 것이다. 더불어 치환체의 크기가 커짐에 따라 입자의 크기가 증가하게 되고 이로 인해 입자간의 인력인 van der Waals force가 커지는 것도 녹는점이 높아진 하나의 원인이 될 것이다. 또한 치환체 길이가 길어지면 상대적으로 평면에서 벗어나 구부러진 형태를 갖게 되고 이로 인해 서로간의 마찰이 커지게 된다. 더불어 구조 및 크기에 의한 van der Waals force가 증가하게 되어 결국 점도가 높아지는 결과를 확인하였다. 또한 치환기 내부에 이중결합(double bond) 혹은 hetero atom에 의한 삼중결합(triple bond)을 갖게 되는 경우에는 포화된(saturated) 형태만을 갖는 경우에 비하여 전기 화학적 안정성이 좋다는 것을 알 수 있었다. 이러한 현상 역시 치환체가 이중 또는 삼중 결합을 가지면 상대적으로 평면 구조로 수렴되기 때문에 발생한 것으로 추측된다. 예측한 입체 구조를 통해 앞선 결과를 확인해본 결과 많은 연관성을 가지고 있음을 다시금 확인할 수 있었다.

**Key Words(주요어)** : Ionic Liquids, Imidazolium bis(trifluoromethanesulfonyl)imide, Synthesis(합성 방법), Physical properties(물성), Electrochemical properties(전기 화학적 물성), stereo structure(입체 구조)

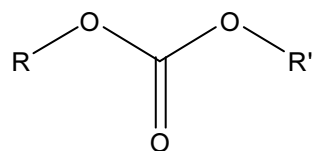
# I. 서 론

## 1. 연구 배경

일을 할 수 있는 능력이란 의미를 지닌 에너지는 인류가 진화해오는 과정뿐 아니라 초기 우주가 형성되고 확장되는 과정에서도 매우 중요한 역할을 해왔다. 이러한 에너지는 산업화 이후 현 시점에 이르기까지 수많은 발전에 기여해오면서 인류에게 소중함을 느끼게 해주었다. 하지만 그 이면에는 어두운 모습을 가지고 있었다. 바로 환경파괴가 그것이다. 지구온난화 및 수질, 토양 오염 등 그 문제의 심각성이 가시적 형태로서 드러나게 됨에 따라 친환경적 에너지원에 대한 관심이 더욱 집중되었다. 친환경적 에너지는 물리적 변화를 이용한 태양에너지, 풍력에너지 등과 화학적 변화를 이용한 이차전지를 예로 들 수 있다. 전자의 경우 그 에너지를 저장하는 방법이 원활하지 못하다는 한계가 있다. 따라서 화학에너지와 전기에너지 사이의 전환을 이용하는 이차전지가 차세대 에너지 저장장치로서 떠오르게 된 것이다. 하지만 최근 들어 휴대폰 및 노트북의 배터리가 폭발하는 사고가 잇따라 발생함에 따라, 이차전지의 이런 단점을 해결할 필요성이 더욱 강조되고 있다. 단점 중 가장 핵심적인 것은 안정성에 관한 것인데 이는 전지의 구성요소인 전해질과 관련이 있다. 이번 연구에서 주목하고자 하는 것은 바로 전해질로서, 몇 가지 기준을 통한 연구 절차를 통해 안전한 이차전지를 구현하고자 한다.

## 2. 연구 목적

앞서 배경에서도 밝혔듯이 현재 친환경적 에너지원의 필요성이 대두되고 있는 시점에서 이차전지가 차세대 에너지원으로서 주목받고 있다. 하지만 최근 몇 가지 폭발 사고 등이 발생하게 됨에 따라 안전에 대한 확보가 필요함을 생각하게 되었다. 현재 상용화되어



<그림 1> carbonate 구조식

있는 이차 전지는 노트북이나 휴대폰에 사용되고 있다. 이 이차 전지에는 전지에서 양극(cathode)과 음극(anode)사이의 전자 혹은 이온의 이동을 도와주는 매개체 역할을 하는 물질인 전해질(electrolyte)로 carbonate와 첨가제를 혼합하여 사용해왔다. 여기서 carbonate란 탄산( $\text{H}_2\text{CO}_3$ )의 수소 두개가 다른 물질로 치환된 형태로  $\text{C}=\text{O}$ 의 carbonyl기를 중심으로 양쪽에 산소를 가지는 물질이다. 구조는 오

른쪽과 같다. 그런데 이 혼합물이 폭발 사고의 가장 큰 원인으로 밝혀졌다. 따라서 보다 더 나은 안정성을 갖춘 전해질에 대한 연구가 필요하게 되었다. 이로써 시작된 것이 바로 이온성 액체(ionic liquid)에 대한 연구이다. 이온성 액체는 carbonate와 마찬가지로 유기 물질이다. 하지만 상대적으로 열적·전기화학적 안정성이 높아 폭발성이 현저히 낮다고 입증된 물질이다. 또한 양이온(cation)과 음이온(anion)의 조합을 자유롭게 조절하여 여러 가지 형태를 구현할 수 있는 장점을 가진다. 따라서 이번 연구를 통해 다양한 이온성 액체에 대한 물성 평가를 바탕으로 최종적으로는 안정적인 이온성 액체가 적용된 안전한 이차전지를 구현하고자 한다.

## II. 배경 이론 및 선행 연구의 검토

### 1. 배경 이론

리튬(Lithium) 이차 전지는 전기기구나 혹은 전기 운송 수단에서 사용하는 매우 중요한 차세대 에너지 저장 장치 중 하나이다. 전지에 쓰이는 많은 전극(electrode)이 있지만 그 중 성능이 뛰어나다고 알려진 것은 리튬 금속을 사용하는 경우이다. 하지만 리튬의 경우 물성평가의 한 방법으로서 충전과 방전 과정을 한번 반복하는 cycling을 몇 차례 시행한다. 이때 전극 표면에서 리튬이 전자가 이동하게 되는 전기화학적 작용에 의해 분해되고, 침전되는 과정이 일어난다. 이를 deposition과 dissolution이라 하며 리튬의 분해로 인해 전극 표면에 dendritic morphology, 즉 dendrite를 형성하게 된다. 이러한 dendrite가 형성되면 전지 수명에 있어서 short circuit을 가져오고 또한 부분적인 가열이나 혹은 폭발을 일으킬 수 있게 된다. 이러한 폭발에 영향을 미치는 요소에 대해 아는 것이 무엇보다 가장 중요한 문제이므로 우선 이차 전지를 구성하는 몇 가지 요소에 대해 알아보고자 한다.

이차 전지를 구성하는 요소에는 총 네 가지가 존재하는데 양극(cathode), 음극(anode), 분리막(separator), 그리고 전해질이 있다. 기본적으로 전지는 그 자체를 얼마나 오래 쓰고(수명) 또한 충전 후 그 사용시간이 얼마나 길게 지속될 수 있는가(용량)라는 문제가 중요하다. 여기에 관여하는 것은 앞서 말한 네 가지 요소

중 양극과 음극이다. 하지만 그보다 가장 중요한 것은 이미 언급한 바와 같이 바로 얼마만큼 안전한가 하는 문제이다. 아무리 긴 수명과 충분한 용량을 갖춘 전지라 하더라도 항상 폭발과 같은 위험성이 내재되어 있다면 큰 시장을 초래하기 때문이다. 안전성에 관여하는 요소는 바로 전해질이다. 휘발성 및 폭발성을 가진 첨가제를 혼합한 carbonate 계열의 유기 용매(organic solvent)를 전해질로 사용할 경우 안전에 대한 위험성이 커지게 된다. 즉, dendrite에 의해 유발될 수 있는 부분적인 가열이나 혹은 폭발을 더욱 가중시키는 역할을 하게 된다는 것이다. 따라서 안전한 전해질이 필요하게 되었고 이를 계기로 연구된 것이 이온성 액체이다.

우선 이온성 액체에 대한 정의를 살펴보면 상온, 일반적으로 100도 이하에서 액체로 존재하는 염을 말한다. 낮은 녹는점을 가지면서 열적, 전기화학적 안정성을 가지고, 또한 증기압력이 낮고 폭발성이 없다는 장점을 가진다. 더불어 무엇보다 이온성 액체의 큰 장점은 유기물의 양이온과 음이온으로 구성되어 있다는 것이다. 이는 여러 종류의 분자를 통한 합성으로서 다양한 형태의 물질을 보다 쉽게 구현할 수 있다는 것을 의미한다. 이러한 이유로 이온성 액체가 매력적인 물질로서 인식됨에 따라 solvent(반응의 매개체) 혹은 전지의 전해질로서 사용되고 있다. 하지만 이온성 액체도 지금까지 전해질로 사용해왔던 carbonate 계열의 물질에 비하여 점도와 가격이 상대적으로 높은 반면 성능이 낮다는 문제점이 있다[8]. 이로 인하여 그동안 연구되어 왔던 여러 물질 중에서도 양이온으로는 imidazolium-based 이온성 액체를 사용하는 경우가 주목을 받고 있다. 전하(charge)를 넓게 분산시켜 주는 역할을 통해 점도가 낮아지게 되고 이로서 높은 전도도를 갖기 때문이다. 더불어 녹는점이 낮다는 장점을 갖기도 한다. 음이온의 경우에는 이온성 액체의 녹는점 및 점도를 낮추는데 기여한다고 알려져 있는 bis(trifluoromethanesulfonyl)imide (TFSI<sup>-</sup>)가 가장 널리 연구되고 있다. 따라서 이번 연구에서 합성하고자 하는 이온성 액체 역시 imidazolium을 바탕으로 치환체를 변환한 양이온과, TFSI<sup>-</sup>를 음이온으로 구성하였다. 또한 이번 연구에서는 보다 안정성을 갖춘 이온성 액체를 구현하는 것이 목적이므로 안정성의 자료가 되는 기본적인 물리적 특성을 확인하였다. 따라서 기준 및 방법을 설정하고자 하며, 선행되어왔던 연구에 대해 살펴보려고 한다.

## 2. 선행 연구의 검토

이온성 액체에 대한 연구가 시작되기 이전에도 이온으로 구성된 물질들의 종류는 매우 다양하였다. 일반적으로 이온으로 구성된 물질의 경우 양이온의 (+)전하와 음이온의 (-)전하가 서로 이온결합을 함으로써 빈틈없이 결합(packing)된 구조를 가지게 된다. 따라서 대체로 상온에서 고체 상태로 존재한다는 특징을 가지고 있다. 이전까지의 이온 구성 물질들은 모두 그러하였다. 초기에 연구되었던 이온성 액체의 경우에도 역시 상온에서 액체 상태를 유지하는 것이 매우 불안정하였다.

그러던 중 1992년 Wilkes에 의해 1-ethyl-3-methylimidazolium-tetrafluoroborate (EMI-BF<sub>4</sub>)가 발견되었다. 이는 상온에서도 안정하게 액체 상태를 유지할 수 있는 이온성 액체였다. 이를 바탕으로 탄소의 개수를 늘려가면서 탄소와 탄소만으로 이루어진 alkyl 계열의 치환체를 양이온에 변화시켜감에 따라 물질을 합성하였다. 또한 탄소 이외의 산소, 질소 등의 hetero atom으로 구성된 치환체를 이용하면서 다양한 물질을 찾아내었다. 이처럼 양이온에 대한 많은 연구가 진행된 것은 음이온에 비하여 합성 방법이 매우 편리하며 다양한 형태를 구현할 수 있기 때문이었다. 연구를 진행해나감에 따라 연구자들은 질소가 들어간 물질이 양이온으로서 안정하다는 것을 알게 되었다. 왜냐하면 질소의 경우 중성을 유지하는 상태에서 세 개의 결합이 가능하며 추가적으로 하나의 결합이 더 진행될 경우 양이온이 되면서도 안정할 수 있기 때문이다. 하지만 합성된 이온성 액체가 imidazolium 계열의 양이온과 BF<sub>4</sub>를 음이온으로 하는 형태에서 벗어남에 따라 더 이상 액체 상태를 안정하게 유지하지 못하게 된다. 음이온에 문제가 있음을 알게 되었으며 그러던 중 일본의 재료 연구 분야에서 새롭게 TFSI<sup>-</sup>를 발견하게 되었다. 이렇게 구성된 이온성 액체는 보다 안정하게 액체 상태를 유지하게 되었고 더 나아가 전기화학적 안정성을 갖춘 것으로 ammonium 계열의 물질을 양이온으로 연구하게 되었다. 하지만 녹는점이나 점도 등의 기본적 물성이 좋지 않다는 문제를 나타내면서 이 후 황, 인을 비롯하여 여러 물질로 구성된 양이온과 BF<sub>4</sub>에서 변형된 BF<sub>3</sub>CH<sub>3</sub>와 같은 음이온 등을 바탕으로 연구는 폭넓게 진행되었다.

지금까지 quaternary ammonium, pyrrolidinium, triazolium, phosphonium, piperidinum과 particularly imidazolium 등이 여러가지 음이온과 결합한 형태가 있었다. 몇 가지 주요 연구에 대해 살펴보면 Imidazolium-BF<sub>4</sub>[1], 1-alkenyl-2,3-dimethylimidazolium-BF<sub>4</sub>[2] 및 pyrrolidinium-TFSI, pi-



peridinium-TFSI[7] 등의 물질이 있었다. 이중 EMI-TFSI가 대표적으로 가장 많은 연구가 된 물질이다. 그러나 EMI-TFSI 역시 전기화학적 안정성을 확인하는 방법인 cycling에서 분해가 진행된다는 사실이 발견되었다. 따라서 여러 가지 변화를 시도해 보았지만 긍정적 결과를 이끌어내지 못하였다. 연구를 시작하기에 앞서 살펴본 것으로서 최근 일본에서 연구 및 발표된 논문[4]에 의하면 1-cyano-propyl-3-methylimidazolium-TFSI(CpMI-TFSI)와 1-cyanomethyl-3-methylimidazolium-TFSI(Cm MI-TFSI)이 기존의 EMI-TFSI에 비하여 전기화학적 안정성이 우수하다고 밝혀졌다. 이 연구를 바탕으로 볼 때 치환기의 변화에 따라 물성과 전기화학적 안정성에서 차이가 나타남을 다시금 확인 할 수 있었다. 더불어 구조적인 측면에 있어서도 영향이 있음을 생각해볼 수 있었다. 기존 연구를 바탕으로 생각하면 다른 양이온 물질들에 비해 평면구조를 가지는 imidazolium 계열의 경우 물성이 우수하였다. 상대적으로 낮은 점도와 녹는점 및 높은 전도도를 가지기 때문이다. 또한 앞선 일본의 연구에서는 단순한 alkyl기와는 달리 평면 구조를 가지는 cyano계열의 치환체의 경우 더 좋은 전기화학적 안정성을 나타냈다. 이에 착안하여 상대적으로 평면 구조와 같이 특정 구조를 가지게 되면 보다 우수한 물성이 나타난다는 가설을 설정하게 되었다. 따라서 일반적인 alkyl 계열의 치환체와 함께 cyano와 같이 hetero atom이 포함된 치환기를 이용하여 물성을 비롯한 전기화학적 안정성을 평가하고 구조와의 상관성을 밝혀내보고자 한다.

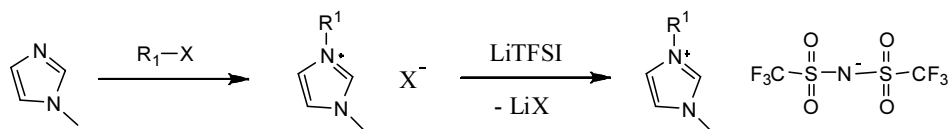
### III. 연구 방법

#### 1. 연구 대상 물질에 대한 합성 과정

우선 이번 실험에서 합성하고자 하는 이온성 액체의 형태는 다음과 같다(그림 2 참조)[1]. Imidazolium은 오각형의 ring 구조로서 1번과 3번 위치에 질소가 존재한다. 1번 질소에 치환된 치환체를  $R^1$ , 3번 질소에 치환된 치환체를  $R^2$ 라 하자. 이제  $R^2$ 를 methyl기로 고정시킨 후  $R^1$ 에 대하여 C의 개수를 늘려가면서 몇 가지 alkyl 계열의 치환체를 붙여준다. 또한 hetero atom 중 특정 물질을 선정하여 치환체로서 붙여주어 이온성 액체의 양이온을 설정한다. 음이온으로는 TFSI를 사용하도록 한다. 실제적인 합성 방법은 다음과 같다. 생성물의 합성을 위해서는 총 두

단계의 과정을 거쳐야 한다. 우선 첫번째는 R<sup>2</sup>가 methyl 기로 치환된 imidazole 을 준비한다. 그리고 원하는 R<sup>1</sup>에 halide 계열의 물질이 치환된 alkylhalide (R<sup>1</sup>-X)를 준비한다. 여기서 halide 물질이란 17족의 원소들로서 전자가 충분하여 반응성이 좋으므로 치환체와 결합시켜 치환반응에 많이 이용된다. 참고로 반응성이 좋은 iodide(I)가 치환된 형태의 alkylhalide가 많이 사용된다. 이제 이들 물질 각각을 1당량과 1.2당량씩 사용하여 acetonitrile을 용매로 30 °C 온도로 24 시간에서 48시간 반응시킨다. 이 때 halide 계열의 물질은 끓는점이 낮아 쉽게 기화하므로 반드시 reflux를 설치해주어야 한다. reflux는 어떤 물질이 일정 온도를 넘어서서 기화되면 냉각수가 흐르는 관을 통과하게 하여 온도를 낮춰주는 작용을 한다. 휘발된 물질이 다시 액화되어 외부로 손실되는 것을 막고 반응기로 회수되는 효과를 기대하는 장치이다. 이러한 첫 번째 단계는 양이온과 X를 음이온으로 갖는 물질이 합성되며, 생성물에 대한 수율에 영향을 미치게 된다.

두 번째 단계는 음이온을 TFSI<sup>-</sup>로 exchange 해주는 단계로 물을 용매로 이용하여, LiTFSI 1당량을 상온에서 24시간 반응시켜준다. 최종적으로 우리가 원하는 양이온과 음이온을 갖는 이온성 액체를 얻게 되며, 그 과정을 정리하면 다음과 같다.



<그림 2> 최종 생성물에 대한 전체적인 합성 과정(scheme)

합성된 물질에 대하여 원하는 생성물인지에 대한 판단은 소량의 물질을 CDCl<sub>3</sub>를 용매로 하여 NMR sample을 만들어 확인한다. TMS를 기준으로 하여 <sup>1</sup>H-NMR과 <sup>13</sup>C-NMR spectra를 통해 sample의 chemical shift(δ) 값을 확인하도록 한다. TMS는 Tetramethyl silane(TMS)으로서 NMR sample에 첨가되어 기준이 되는 역할을 하며 chemical shift(δ) 값은 0.0 ppm이 된다. 하나의 peak로만 나타나고 상대적으로 가장 electronegativity가 작다고 판단되어 NMR 측정값의 기준으로 사용한다.

## 2. 물성 측정 방법

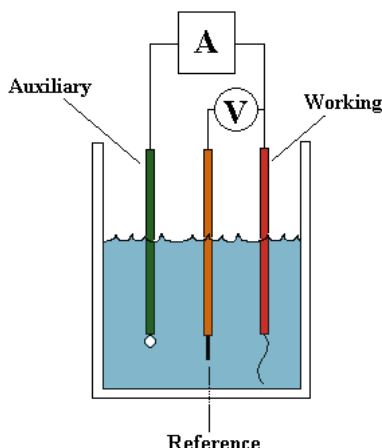
### (1) 기본 물성의 측정(녹는점 및 점도)

우선 녹는점( $T_m$ )의 경우, TA Instrument Differential Scanning Calorimeter(DSC) Q1000을 사용하여 측정하게 된다. 측정은 질소 기체 환경 내에서 이루어지며  $-80^{\circ}\text{C}$ 에서  $100^{\circ}\text{C}$ 까지  $10^{\circ}\text{Cmin}^{-1}$ 의 속도로 가열해주고 그 후 같은 속도로 냉각시켜준다. 이를 통해 sample의 온도를 올리는 데에 필요한 열이 기준 물질과 얼마나 차이 나는지를 온도의 함수로써 나타내게 되는데, 이를 thermogram이라 한다. 고체에서 액체로 상변화가 일어날 경우 일반적으로 더 많은 열이 필요하며 이를 통해 녹는점을 측정한다. 점도( $\eta$ )의 경우에는 Brookfield DV-II + cone/plate viscometer를 이용하여 측정한다. 얇은 원통에 측정 물질을 넣고 장착하여 측정기의 원판이 물질 위에서 회전하는 정도에 따른 저항을 확인한다. 확인한 저항을 점도로서 변환함에 따라 점도에 대한 정보를 얻게 된다. 측정값의 기준이 되는 것은 물로서 1 cP에 해당한다.

### (2) 전기 화학적 물성의 측정 (Cyclic voltammogram)

전기 화학적 물성은 Cyclic voltammetry의 원리를 이용하여 측정하게 된다. Cyclic voltammetry라는 것은 potentiodynamic electrochemical 측정의 한 형태이다. 우선 앞선 실험에서 합성한 이온성 액체를 이용하여 cell을 만들게 된다. 실제 실험에서의 cell의 형태는 간단히 유리 vial에 담아 여기에 전극을 설치하여 측정하도록 한다. 편의상 전극은 두 개를 쓰기도 한다. 그러나 보다 정확성을 높이기 위해 총 세 개의 전극을 이용한 삼 전극 system을 사용하고자 한다. 전체적인 cell의 구성에 대하여 살펴보면, working electrode와 counter electrode 그리고 reference electrode가 이온성 액체에 담겨 있는 형태이다. 여기서 이온성 액체는 반응의 매개체 역할을 한다. 무엇보다 가장 중요한 원리가 되는 것은 cell에 가하게 되는 전압의 변화에 따른 전극 사이의 전류의 흐름을 인식하는 것이다. 실제 실험에서는 working electrode에서 reference electrode로 전압 변화를 가하게 되며, 이러한 전압 변화를 scan rate라고 한다. 연구에 이용한 자료는  $10\text{ mV/s}$ 로 측정하였다[1]. 전압 변화를 통하여 반응이 일어나는 부분은 working electrode이며, 여기에서의 반응이란 전자가 나오는 것을 의미한다. 이 때 coun-

ter electrode에서는 working electrode로부터 발생한 전자의 흡착 현상이 일어난다. 이로 인해 나타나는 전류의 흐름은 working electrode와 counter electrode 사이의 전류 값으로 측정된다. 이렇게 측정한 전류의 변화를 그래프로 나타낸 것이 Cyclic voltammogram이다. 이를 통해 이온성 액체가 분해되지 않고 안정하게 존재할 수 있는 구간에 대해 파악할 수 있다. 기존 연구에서 사용한 cell의 경우 working electrode는 platinum electrode를, counter electrode는 platinum foil을, reference electrode는 silver wire를 사용하였다. cell을 간단히 모형으로 나타내면 오른쪽과 같으며 여기서 auxiliary는 counter와 같은 용어이다.



**<그림 3> Cyclic voltammogram  
측정을 위한 cell의 모형**

### 3. 입체 구조 예측 방법

이온성 액체의 입체 구조에 관한 연구는 현재에도 많이 진행되고 있으나 양이온과 음이온으로 구성되어 있어서 어려움을 겪고 있다. 따라서 이번 연구에서는 가상적으로 몇 가지 이온성 액체 중 양이온에 대해서만 살펴보고자 한다. 음이온의 경우 모두 TFSI<sup>-</sup>로 같으므로 양이온의 구조가 기준이 되어 가장 절대적인 영향을 미치게 될 것이라 생각하였기 때문이다. 따라서 cation의 평면 구조를 그려보고 그에 대한 입체 구조 즉, 3D 모형을 최소한의 에너지를 갖게 됨으로서 안정화 시킨 형태로서 구현해보고자 한다. 이를 위하여 ChemBio 3D Ultra 11.0.1 CambridgeSoft Corp. 프로그램을 이용하고자 한다.

## IV. 연구 결과

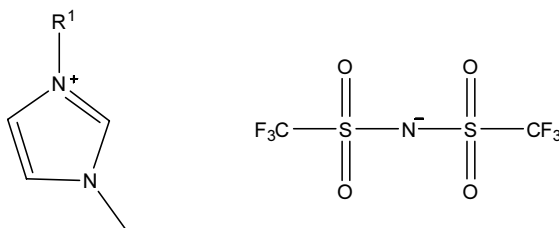
### 1. 기본 물성의 비교

기본 물성을 비교하기 위해 앞서 우선 실제적인 합성 여부에 대한 판단(수율)을 하고자 하였다. 이에 대한 비교 자료로 선택한 것은 이미 선행적으로 시행되었던 Imidazolium-BF<sub>4</sub>[1]에 관한 연구였다. 이미 연구 방법에도 밝혔듯 합성 가능성에 가장 큰 영향을 미치는 단계는 첫 번째이며 이번 연구가 Imidazolium-BF<sub>4</sub>와 차이를 갖는 부분은 합성 단계 두 번째에서 나타난다. 따라서 합성 여부에 대한 판단을 앞선 연구의 자료를 바탕으로 하는 것에 문제가 없을 것으로 생각된다. 선행 연구 자료를 바탕으로 수득률에 대해 조사한 결과 다양한 alkyl기를 치환체로 갖는 Imidazolium의 경우 85~98%의 높은 값을 나타냄을 알 수 있었다. 실제 실험을 통하여 TFSI로 음이온 exchange하여 최종 생성물을 얻게 될 경우 합성 물질을 확인하는 방법에 대해 생각해 보면 다음과 같다. 이는 <sup>1</sup>H-NMR과 <sup>13</sup>C-NMR을 이용하여 확인할 수 있는데, 앞선 연구에서 양이온이 같고 음이온의 차이만 있을 경우 음이온의 영향에 의해 약간의 chemical shift( $\delta$ )의 차이는 나타날 수 있다. 하지만 <sup>1</sup>H-NMR에서는 같은 peak pattern이 나타나게 된다. <sup>13</sup>C-NMR의 경우에는 음이온에 존재하는 탄소가 불소(F)에 의해 peak pattern이 4개로 갈라지는 특정한 peak를 통해 확인할 수 있다.

이제 본격적으로 물성에 대해서 파악하고자 하는데, 기본적으로 분자량에 대해서 살펴보고자 하며, 앞서 연구에서도 밝혔듯 녹는점과 점도에 대해서 알아보하고자 한다. 이에 대한 결과는 다음과 같다.

R<sup>1</sup> : 1번 질소에 치환된 치환기의 종류

M(g/mol) : 분자량, T<sub>m</sub>(°C) : 녹는점,  $\eta$  (cP) : 점도, Y (%) : 수득률(yield)



<그림 4> 최종 생성물의 model

<표 1> 여러 가지 생성물에 대한 기본 물성 및 수득률<sup>a)</sup>

R <sup>1</sup>	M (g/mol)	T <sub>m</sub> (°C)	η (cP)	Y (%)
Methyl (CH <sub>3</sub> )	376.99	26	44	–
Ethyl (C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> )	391.01	–18	34	95 <sup>**</sup>
Propyl (C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> )	405.03	–9 <sup>*</sup>	–	92 <sup>**</sup>
Allyl (CH <sub>2</sub> CHCH <sub>2</sub> )	403.01	ND <sup>***</sup>	–	98 <sup>**</sup>
Propargyl (CH <sub>2</sub> CCH)	400.99	46 <sup>*</sup>	–	85 <sup>**</sup>
Butyl (C <sub>4</sub> H <sub>9</sub> )	419.04	–6	52	96 <sup>**</sup>
Crotyl (CH <sub>2</sub> CHCHCH <sub>3</sub> )	417.03	ND	–	88 <sup>**</sup>
Methallyl(CH <sub>2</sub> C(CH <sub>2</sub> )CH <sub>3</sub> )	417.03	ND	–	90 <sup>**</sup>
Hexyl (C <sub>6</sub> H <sub>13</sub> )	447.07	–6	87.3	–
Octyl (C <sub>8</sub> H <sub>17</sub> )	475.10	37	119.3	–
PhCH <sub>2</sub>	453.03	ND	113	–
Ph(CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub>	467.04	37	187	–
Ph(CH <sub>2</sub> ) <sub>3</sub>	481.06	48	196	–
Cyanomethyl (CH <sub>2</sub> CN)	401.99	–	–	–
Cyanopropyl (C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> CN)	430.02	–	–	–

a) 참고 문헌의 [1][5][6] 참조

\* : Imidazolium-BF<sub>4</sub>의 실험 결과이며 TFSI<sup>–</sup>의 경우 상대적으로 더 낮은 값을 갖게 됨

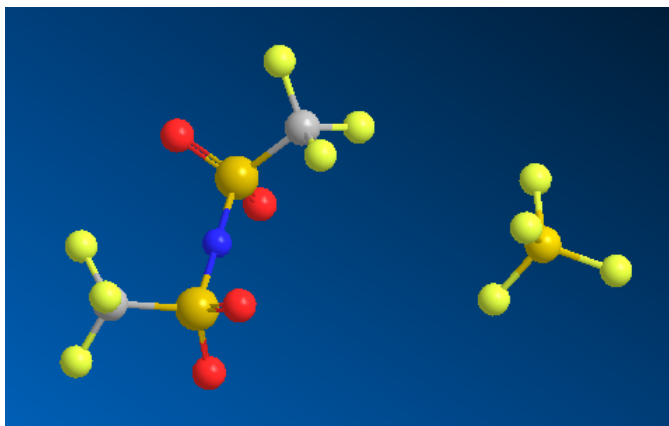
\*\* : Imidazolium-BF<sub>4</sub>의 실험 결과이며 TFSI<sup>–</sup>의 경우와 크게 다르지 않을 것으로 예상 됨

\*\*\* : 측정되지 않은 값을 의미 (not detected)

– : 해당하는 자료가 존재하지 않음

우선 녹는점과 관련하여 일반적인 alkyl기에 대해서만 살펴보면 다음과 같다. 탄소의 수가 증가할수록, 다시 말하면 alkyl chain의 길이가 길어지게 됨에 따라 녹는점이 대체로 증가하게 됨을 알 수 있다. 하지만 그보다 여기서 주목해야 하는 것은 alkyl chain의 탄소 수가 2~10개인 경우 상온에서 모두 액체로 안정되게 존재한다는 것이다. 이온성 액체의 경우 반응의 매개체 혹은 전해질로 사용하기 위해서는 적어도 상온에서는 안정되게 액체로 존재해야 한다. 이전 연구를 바탕으로 비교해보면 이번 연구에서 음이온을 TFSI<sup>–</sup>로 변화시켜주면 녹는점이 낮아질 것이라고 기대하였기 때문이다. 녹는점이 낮아지는 이유에 대하여 생각해보면 음이온이 TFSI<sup>–</sup>인 경우 BF<sub>4</sub><sup>–</sup>에 비하여 상대적으로 더 크기가 커지게 된다. 일반적으로 이온입자의 경우에는 서로 이온결합을 이루게 됨에 따라 단단하게 결합한 구조로서 규칙적으로 서로 격자를 구성하듯 결합한다. 단단하고 규칙적인 결합을 이룬다는 것은 안정되게 고체 상태로 존재하게 됨을 의미한다. 하지만 양이온에 비하여

음이온이 상대적으로 크기가 큰 경우에는 규칙적인 배열이 어긋나게 되고, 결국 빈틈없이 메워진 단단한 형태의 결합을 이룰 수 없게 된다. 따라서 상온에서 고체가 아닌 유동성을 가진 액체로 존재하게 된다는 것이다. 더구나 음이온을  $\text{BF}_4^-$ 에서  $\text{TFSI}^-$ 로 변화시킬 경우에는 액체 상태로의 존재를 더욱 기대할 수 있게 되는 것이다. 두 음이온에 대한 크기 비교 결과는 다음과 같다.



<그림 5> TFSI<sup>-</sup>(왼쪽)와 BF<sub>4</sub><sup>-</sup>(오른쪽)의 크기 비교

또한  $\text{Ph}(\text{CH}_2)_n$ 의 경우에는 일반적인 alkyl기와 마찬가지로  $\text{CH}_2$ 수가 늘어나게 됨에 따라 녹는점이 증가하는 경향을 보였다. 하지만 비교적 녹는점이 높아서 상온에서는 액체로 안정되게 존재하지 못하였다. 이는 탄소수가 늘어난 alkyl기에 의한 영향과 같다고 볼 수 있다. 양이온에 비하여 음이온의 크기가 아주 커지게 되면 이미 언급하였듯이 격자구조를 이루기 어려워진다. 하지만 치환체의 크기가 커지면 이러한 효과가 떨어진다. 더불어 추가적인 영향을 생각해보면 입자간 인력을 녹는점 상승의 원인으로 볼 수 있다. 치환체의 크기가 커지면서 합성한 물질의 크기 자체가 커지고 이로 인해 분자량에 비례한 입자 간의 인력인 van der Waals force가 커지게 되기 때문이다. 따라서 녹는점이 증가하게 된 것이다.

두 번째로 점도에 대해서 살펴보고자 한다. 우선 기존 연구 결과에 따르면 일반적인 alkyl기 및  $\text{Ph}(\text{CH}_2)_n$ 의 경우 모두 탄소의 수가 증가하게 됨에 따라 점도가 커졌다. 또한 상대적으로 alkyl기에 비하여  $\text{Ph}(\text{CH}_2)_n$ 가 더 큰 점도를 갖게 됨을 확인하였다[5]. 이는 상대적으로 치환기의 크기가 커지게 되면 치환체가 에너지면에서의 안정성을 갖기 위해 구부러지는 구조를 갖게 되고 이로 인해 평면 구조에

서 벗어나게 된다. 따라서 분자간의 마찰 및 전체적인 크기 증가에 의한 입자 간의 van der Waals force가 증가하게 된다는 것을 살펴볼 수 있었다. 일반적인 alkyl 기에 대하여 탄소 수 증가에 따른 점도의 변화를 그래프로 나타내면 다음과 같다.

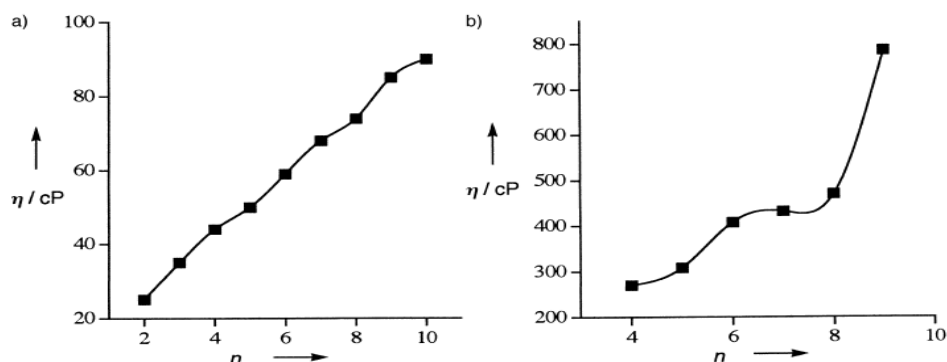


Figure 1. Influence of the 1-alkyl group on the viscosity of the a)  $[C_n\text{-mim}]\text{NTf}_2$  and b)  $[C_n\text{-mim}]\text{PF}_6$  ionic liquids.

#### <그림 6> alkyl기의 탄소 수 증가에 따른 점도의 변화 (a)graph에 해당함<sup>b)</sup>

b) 참고 문헌의 [5] 참조

여기서 무엇보다 중요한 것은 이온성 액체에 있어서 점도가 갖는 의미이다. 이는 다공성 구조로 이루어진 전극의 내부와 관련한다. 다공성 구조를 이루는 것은 상대적으로 표면적을 넓히기 위한 효과에 의한 것이다. 이차 전지에서의 반응이란 충전과 방전을 말하며 실제로 리튬 이온이 표면에서 흡착함에 따라 발생한다. 반응이 일어나기 위해서는 전해질, 즉 이온성 액체에 의해 표면과의 접촉이 일어날 수 있어야 한다. 만약 이온성 액체가 다공성 구조의 내부로 들어가지 못한다면 겉 표면에서만 반응이 일어나게 된다. 그러므로 이온성 액체가 다공성 구조의 내부로 충분히 스며들어가서 접촉 면적을 넓혀주어야 한다. 이에 영향을 미치는 것이 바로 점도이다. 점도가 클 경우 내부로 스며들어가갈 수 없게 되고, 따라서 이온성 액체는 되도록 낮은 점도를 가져야 한다. 결과적으로  $\text{BF}_4^-$ 에서  $\text{TFSI}^-$ 로 변화시킨 것은 녹는점에 대한 기대와 더불어 점도를 낮추는 효과를 함께 가지고 있다.



## 2. 전기 화학적 특성의 비교

전기 화학적 특성의 경우에는 Cyclic voltammogram의 결과를 바탕으로 분석하였다. 일반적으로 리튬 대비 측정의 경우 0.3~4.0V에서 안정성을 갖출 때 이차 전지에서 상용화될 수 있는 기준으로 여긴다. 그러나 이는 상대적인 수치이기 때문에 은(Ag) 대비의 경우에는 리튬 대비 측정값보다 3.0V 낮다. 주어진 값에 3.0을 더하여 비교하면 리튬 대비 측정값으로 환산된 것으로 생각할 수 있다. 측정된 값에 대하여 상용화 기준 범위 내에서 안정하지 못한 경우에는 계속 사용하면 전지 내부에서 이온성 액체의 분해가 일어난다. 이 분해 현상은 전지의 수명을 단축시킨다. 선행 연구와 관련하여 음이온이  $\text{BF}_4^-$ 와 TFSI $^-$ 로 차이를 갖는 경우에 대해서 생각해 보았다. 양이온이 같은 경우 전기 화학적 안정성이 약간의 값의 차이를 보일 수 있으나 큰 영향은 미치지 않음을 알 수 있었다. 실험을 통해 측정된 Cyclic voltammogram의 결과는 다음과 같다[1][4].

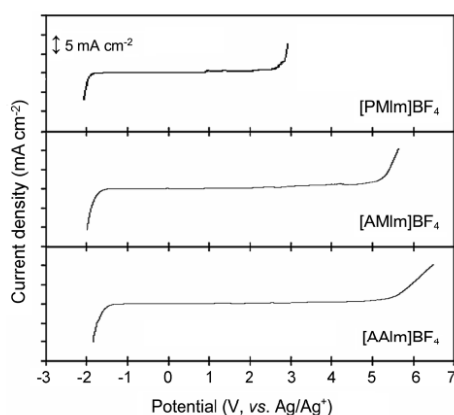


Figure 2. Cyclic voltammograms of the allyl-substituted imidazolium tetrafluoroborates.

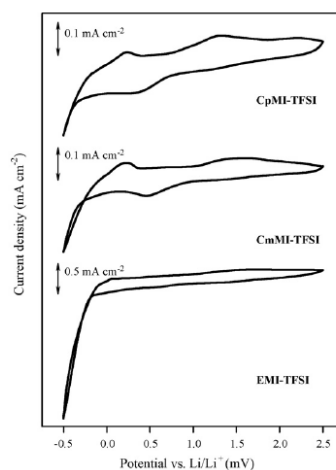


Fig. 2. Cyclic voltammograms for lithium deposition/dissolution on a stainless-steel electrode at 25 °C in CpMI-TFSI, CmMI-TFSI and EMI-TFSI electrolytes, respectively.

### <그림 7> Cyclic voltammogram의 비교<sup>9)</sup>

c) 참고 문헌의 [1][4] 참조

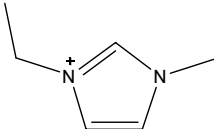
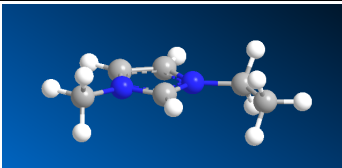
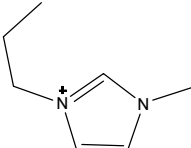
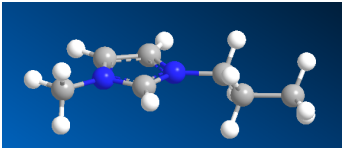
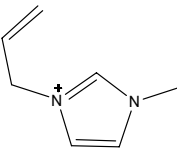
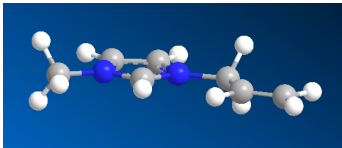
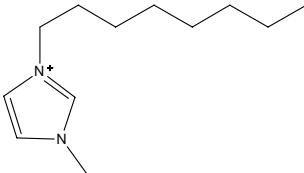
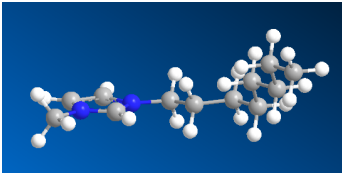
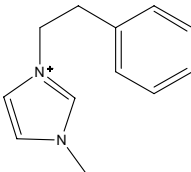
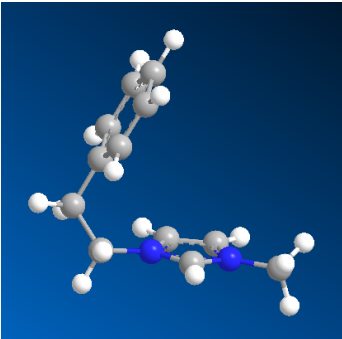
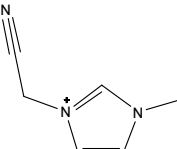
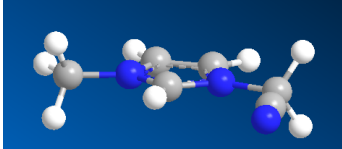
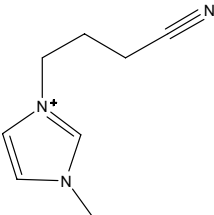
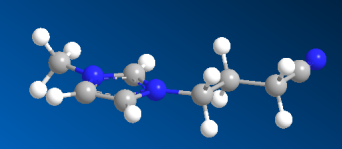
참고로 Cyclic voltammogram에서 선형에서 크게 벗어나는 부분이 의미하는 것은 앞서 언급한 분해의 시점으로 생각할 수 있다. 주어진 Cyclic voltammogram을 살펴보면 우선 왼쪽 그래프의 경우 첫 번째와 두 번째 그래프를 비교할 수

있다. PMIm은 치환기가 propyl이며 AMIm은 allyl인 경우를 말한다. 안정한 범위에 대해 살펴보면 Lithium 대비 측정값으로 생각할 경우 PMIm은 약 1.0~6.0V의 범위를, AMIm은 1.0~8.0V로 상대적으로 더 넓은 범위를 가졌다. 두 치환기는 탄소의 개수는 같지만 치환기에의 이중결합(double bond)의 유무가 다르다. PMIm은 모두 단일결합(single bond)로 이루어진 반면 AMIm의 경우 이중결합을 갖고 있다. 상대적으로 탄소와 탄소 사이에 이중결합을 갖는 구조인 olefin계열의 치환체를 가지는 경우가 결합 내부에 오로지 단일결합으로만 이루어진 saturated된 경우에 비하여 전기 화학적 물성이 좋다는 것을 확인 할 수 있었다. 또한 [그림 7]의 오른쪽 그래프는 세 가지 경우를 보여주고 있다. 우선 치환체로서 ethyl을 가지는 EMI보다 cyano기를 포함한 치환체인 CmMI(cyanomethyl)와 CpMI(cyanopropyl)가 더 안정함을 알 수 있었다. 여기서 주의해야할 것은 y축의 scale인데 위의 두 그래프를 EMI와 같은 범위로서 y축을 조절해 준다면 거의 선형의 그래프로 나타나게 됨을 알 수 있다. EMI와 달리 CmMI와 CpMI의 경우에는 내부에 삼중결합(triple bond)을 가지는 특징을 가진다. 이는 앞선 AMIm의 경우와 마찬가지로 생각할 수 있다. 다시 말해 상대적으로 이중 혹은 삼중 결합을 가질 경우 평면 구조에 가까워지게 되지만 saturated인 경우에는 구부러지는 구조를 가지게 된다. 따라서 이를 통해 상대적으로 평면 구조에 가까울수록 전기 화학적 물성이 좋아지는 결과를 확인하였다.

### 3. 입체 구조의 비교

가상적으로 컴퓨터 프로그램을 이용하여 몇 가지 이온성 액체의 입체구조를 예측하였다. 치환체 변화에 따른 양이온에 대하여 예측한 평면 구조 및 입체 구조는 다음과 같다.

<표 2> 생성물에 대한 평면 구조 및 입체 구조의 예측

R <sup>1</sup>	평면 구조	입체 구조
Ethyl (C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> )		
Propyl (C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> )		
Allyl (CH <sub>2</sub> CHCH <sub>2</sub> )		
Octyl (C <sub>8</sub> H <sub>17</sub> )		
Ph(CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub>		
Cyanomethyl (CH <sub>2</sub> CN)		
Cyanopropyl (C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> CN)		

앞선 구조 예측을 통해 우리는 다음의 결과를 알 수 있다. 우선 일반적인 alkyl 기에 대하여 탄소의 수가 늘어날수록 치환기 부분의 크기가 커지게 되고 더불어 구부러지는 현상에 의해 상대적으로 점차 평면 구조에서 벗어나는다. 같은 개수의 탄소를 가진 propyl과 allyl의 경우에서 상대적으로 allyl이 평면 구조에 더 가깝다. 또한  $\text{Ph}(\text{CH}_2)_2$ 의 경우에는 치환체가 평면 구조에서 많이 벗어나 있다. cyano계열의 경우에는 cyanomethyl이 치환체인 경우 cyanopropyl에 비하여 평면 구조에 더 가깝다는 것을 예측할 수 있었다. 이는 단순히 프로그램을 통해 예측한 입체 구조에 불과하지만 이와 연관 지어 앞선 결과에 대하여 고찰해보고자 한다. 이미 치환기의 변화를 통해 생성물의 점도가 증가함을 알 수 있었는데, 탄소 수가 늘어나면서 평면 구조에서 벗어나게 될 것임을 예상하였다. 이에 대해 실제로 입체 구조를 예상한 결과에 있어서도 일치하고 있음을 확인하였다. 입체 구조를 벗어나는 것은 상대적으로 큰 부피를 차지하게 됨을 의미한다. 이럴 경우 서로 간의 interaction과 함께 van der Waals force가 커짐에 따라 점도가 증가하게 된다는 것은 예상 가능한 결과로 생각된다. 또한 이미 언급하였듯 음이온과의 크기 차이도 줄어든다. 따라서 쉽게 격자 구조를 생성하게 되어 녹는점이 높아진다. 더불어 이중, 삼중결합을 갖는 경우 평면 구조에 가까워짐에 따라 전기 화학적 물성도 좋아진다는 점 또한 입체 구조의 예측과 같았다.

## V. 논의 및 결론

이번 연구에서는 Imidazolium TFSI에서의 치환체 변환을 통한 이온성 액체의 합성 여부 및 여러 가지 물성에 대해서 알아 볼 수 있었다. 연구에 수행되었던 모델은 다른 물질들에 비하여 평면구조를 가지게 됨에 따라 기본적으로 좋은 물성을 가지는 imidazolium 계열을 양이온과 녹는점과 점도를 보다 낮게 해주는 TFSI<sup>-</sup>를 음이온으로 사용하는 이온성 액체였다.

우선적으로 선행 연구를 바탕으로 살펴보았던 합성 여부에 대해서는 충분히 실험 가능하고 상용화 가능할 만큼의 높은 수익률을 얻을 수 있다는 것을 확인하였다. 다음으로, 기본적 물성에 대해서 살펴보았다. 일부 측정하지 못한 자료들이 있었으나 전반적으로 alkyl기만으로 이루어진 경우 탄소의 개수가 2~10에 대하여

충분히 상온에서 안정되게 액체로 존재함을 확인하였다. 하지만  $\text{Ph}(\text{CH}_2)_n$  계열의 경우에는 탄소수가 늘어날수록 녹는점이 높아져 상온에서 액체로 존재하지 못하였다. 즉, 치환체의 크기가 커지게 되면서 양이온에 비해 음이온의 크기가 큼에 따라 격자 구조를 이루지 못했던 효과가 떨어지게 됨을 알 수 있었다. 또한 치환체와 더불어 물질의 크기 자체가 커지면서 van der Waals force가 증가하여 녹는점이 높아진다는 것도 확인하였다. 녹는점에 대해서 좀 더 생각해보면 상대적으로 더 낮은 녹는점을 갖는다는 것은 그만큼 낮은 온도에서도 안정되게 액체 상태를 유지할 수 있음을 의미한다. 이는 실제적으로 상용화 될 경우 저온에서도 상온에서만만큼의 물성을 유지하면서 사용할 수 있는 이차 전지를 구현할 수 있다는 것을 의미한다. 따라서 녹는점이 낮을수록 상용화 범위가 넓어질 수 있다는 가능성을 가진다. 점도의 경우에도 마찬가지로 치환체의 탄소수가 늘어날수록 점도가 증가하였다. 이는 치환체가 커지게 될 경우 평면 구조에서 벗어나 서로 간의 마찰력과 함께 크기에 의한 van der Waals force가 증가되었기 때문이라고 예상할 수 있었다. 이온성 액체의 경우 점도가 낮을수록 좋은 이유는 다공성 구조를 가진 이차 전지 내부의 표면적을 충분히 사용할 수 있기 때문이다.

더불어 이 물질의 경우, 양극과 음극간의 리튬 이온의 이동이 더 원활하게 이루어질 수 있다. 전기 화학적 특성의 경우에는 점도와 마찬가지로 상대적으로 평면 구조에 가까울 경우 그 물성이 좋아졌다. 마지막으로 구조와 관련된 부분에 대해서는 컴퓨터 프로그램을 통해 예측한 입체 구조를 통해 최종적으로 확인해보았다. 이를 통하여 상대적으로 평면 구조에 가까운 이온성 액체를 이용할 경우 기본적 물성 및 전기 화학적 안정성을 갖추게 됨에 따라 안전한 이차전지를 구현할 수 있다는 결론을 얻을 수 있었다.

기존 연구와 달리 이온성 액체에 대한 물성을 구조적으로 접근한 것은 새로운 점이지만 실제적으로 실험을 통해 확인해볼 수 없었던 아쉬움이 있었다. 더불어 구조의 예측은 컴퓨터 프로그램을 이용한 가상적 모형에 기반한 것이므로 진위여부에 대해서는 판단할 수가 없었다. 이번 연구의 결과와 선행 연구를 종합해 볼 때 산소와 질소, 황 등을 이용한 좀 더 다양한 치환체 변화를 통하여 새로운 이온성 액체를 구현할 필요가 있음을 느꼈다. 예를 들면 이전까지는 거론되지 않았던 산소와 methyl기가 연결된 methoxy 혹은 탄소와 탄소의 삼중결합으로 구성된 alkyne이 치환체로 붙은 물질을 생각해 볼 수 있다. 무엇보다 앞서 언급한 다양한 치환체가

불은 양이온과 TFSI<sup>-</sup>를 음이온으로 갖는 imidazolium 계열의 이온성 액체의 물성 및 전기 화학적 안정성에 대한 체계적인 자료 구축이 필요하다.

### 〈참고문헌〉

- [1] Gwan-Hong Min, Taeun Yim, Hyun Yeong Lee, et. al, Synthesis and Properties of Ionic Liquids: Imidazolium Tetrafluoroborates with Unsaturated Side Chain, *Bull. Korean Chem. Soc.*, 2007, Vol. 27, No. 6
- [2] Gwan-Hong Min, Taeun Yim, Hyun Yeong Lee, et. al, Synthesis and Physicochemical Properties of Ionic Liquids : 1-Alkenyl- 2,3-dimethyl imidazolium Tetrafluoroborates, *Bull. Korean Chem. Soc.*, 2007, Vol. 28, No. 9
- [3] Hiroyuki Tokuda, Seiji Tsuzuki, Md. Abu Bin Hasan Susan, et. al, How Ionic Are Room-Temperature Ionic Liquids? An Indicator of the Physicochemical Properties, *J. Phys. Chem. B*, 2006, 110, 19593-19600
- [4] Liwei Zhao, Jun-ichi Yamaki, Minato Egashira, Analysis of SEI formed with cyano-containing imidazolium-based ionic liquid electrolyte in Lithium secondary battery, *Journal of Power Sources*, 174, 2007, pp. 352-358
- [5] Sergei V. Dzyuba and Richard A. Bartsch, Influence of Structural Variations in 1-Alkyl (aralkyl)-3-Methylimidazolium Hexafluorophosphates and Bis(trifluoromethylsulfonyl)imides on Physical Properties of the Ionic Liquid, *ChemPhysChem*, 2002, 3, pp. 161-166
- [6] Suojian Zhang, Ning Sun, Xuezhong He, et. al, Physical Properties of the Ionic Liquid: Database and Evaluation, *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 2006, Vol. 35, No. 4
- [7] Taeun Yim, Hyun Yeong Lee, Hyo-Jin Kim, et. al, Synthesis and Properties of Pyrrolidinium and Piperidinium Bis(trifluoromethanesulfonyl) imide Ionic Liquids with Allyl Substituents, *Bull. Korean Chem. Soc.*, 2007, Vol. 28, No. 9
- [8] Hiroyuki Ohno, *Electrochemical Aspects of Ionic Liquids*, Wiley-Interscience A John Wiley & Sons, INC., Publication, 2006
- [9] Joseph M. Horneback, *Organic Chemistry*, 2nd ed., Thomson Brooks/Cole, 2006

## 심사평

우  
수  
상

김 현 수 (공과대학 화학생물공학부)

### Imidazolium TFSI에서의 치환체 변화를 통한 ionic liquid의 합성 및 물성 평가

ionic liquid의 합성 및 물성평가를 통해 전해질로서의 ionic liquid의 안정성 문제를 다루고 있는 본 논문은 이공계 학생의 전공 관련 연구논문의 전형이 어떠해야 하는지를 잘 보여주고 있다. 연구 배경과 연구의 목적을 분명히 기술하고 있으며, 배경 이론과 선행 연구를 성실히 검토함으로써 자신의 연구가 차지하는 현 위치와 연구의 새로움을 분명히 밝히고 있다. 또한 스스로 설정한 과제를 해결하기 위한 연구 방법의 적절성을 설득하기 위해 자신이 수행하고 있는 연구의 방법을 잘 정리하였고, 이로부터 나온 연구 결과 또한 충실하게 정리하여 이를 바탕으로 연구의 의미를 평가할 수 있는 데이터를 분명히 제시하고 있다. 끝으로 얻어진 결과를 바탕으로 이 연구가 가진 의의를 결론적으로 논의하고 있으며 또한 본 연구의 한계와 문제점을 지적함으로써 향후 연구의 방향을 제시하고 있다는 점에서 모범적인 연구논문의 형태를 띠고 있다.

그러나 이러한 형식적인 완벽성에도 불구하고 몇 군데 작은 결점이 눈에 띈다. 너무 형식적으로 전형적인 연구논문의 모습을 갖추려는 노력이 때로는 내용과 형식의 불일치를 낳고 있다. 예컨대 서론의 장에 연구 배경과 연구 목적의 장을 각각 배분하고 있지만 내용상 이들의 구분이 분명하지가 않다. 목적의 일부 구절들은 배경이라는 제목에 더 적절할 것 같고, 연구의 목적 역시 본 연구가 해결하려는 과제가 가진 분명한 문제의식을 드러내는 데에는 그리 성공적으로 보이지 않는다. 논의와 결론의 장 역시 본 연구의 의의와 한계를 지적해야 한다는 지나친 목적의식이

자연스러운 연구의 가치와 문제점을 드러내기보다는 과장된 표현을 만들고 있다는 인상이 든다. 좀 더 욕심을 내자면 딱딱할 수밖에 없는 이러한 전공 연구논문을 동일전공자들뿐 아니라, 타전공자들 역시 흥미를 잃지 않고 읽을 수 있는 친절한 설명과 분명한 문제의식의 공유가 있었다면 훨씬 더 좋은 논문이 될 수 있었을 거라는 아쉬움이 남는다.

김재호(기초교육원 과학과 기술 글쓰기 강의교수)